

ELS TENSIOACTIUS



Estudi comparatiu de l'eficàcia dels tensioactius
catiònics i aniònics

Brais López Millán

Tutores: Anna Guimerais, Marta Sangüesa i Antònia Fontanet

Octubre 2017

INS Secretari Coloma

AGRAÏMENTS

En primer lloc m'agradaria agrair a l'Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC), en especial al Dr. Jordi Esquena Moret, cap del departament de Nanotecnologia Química i Biomolecular, per haver-me ofert l'oportunitat de realitzar la part experimental del meu treball als laboratoris del CSIC i aconsellar-me i aportar idees per a millorar el meu treball.

El meu profund agraïment a l'Elena Gamarra Gasco, investigadora de l'IQAC, per assessorar-me durant tot el treball i dirigir la meva feina al laboratori, ensenyar-me com dur a terme els procediments i aclarir tots els meus dubtes.

També vull agrair l'ajuda de les diverses tutores que he tingut al llarg del treball: Antònia Fontanet, Marta Sangüesa, Elisenda Benet i Anna Guimerais. Especialment a la Marta i l'Anna per haver-me guiat i aconsellat en diversos aspectes al llarg del treball, i per les seves correccions i aportacions.

Per últim m'agradaria agrair als meus pares pel seu suport i per haver-me ajudat en tot el que he necessitat.

ÍNDEX DE CONTINGUTS

| | |
|---|-----------|
| 1. INTRODUCCIÓ I HIPÒTESIS..... | 1 |
| 2. RECERCA I TRACTAMENT DE LA INFORMACIÓ..... | 3 |
| 2.1. PRESENTACIÓ DE CONCEPTES | 3 |
| 2.2. DETERGENTS | 4 |
| 2.2.1. Què són? Per a què s'usen?..... | 4 |
| 2.2.2. Components dels detergents | 6 |
| 2.2.3. Tipus de detergents | 8 |
| 2.2.4. Propietats dels detergents..... | 10 |
| 2.2.5. Efectes dels detergents en el medi ambient | 11 |
| 2.3. TENSIOACTIUS | 13 |
| 2.3.1. Què són? Com actuen? | 13 |
| 2.3.2. Tipus de tensioactius | 15 |
| 2.3.3. Propietats dels tensioactius | 19 |
| 2.3.4. Propietats de l'aigua relacionades amb els tensioactius..... | 22 |
| 3. PART EXPERIMENTAL | 24 |
| 3.1. DISSENY EXPERIMENTAL..... | 24 |
| 3.2. MÈTODES I TÈCNiques DE LABORATORI | 29 |
| 3.2.1. Procés de rentat..... | 29 |
| 3.2.2. Espectrofotometria | 29 |
| 3.3. RESULTATS I DISCUSSIÓ..... | 30 |
| 4. CONCLUSIONS..... | 37 |
| 5. BIBLIOGRAFIA..... | 39 |

1. INTRODUCCIÓ I HIPÒTESIS

Triar el tema del treball de recerca acostuma a ser una decisió complicada, però en el meu cas va ser una elecció molt ràpida, ja que en el moment que des del centre s'oferia la possibilitat de realitzar la part pràctica del treball en un centre amb tant reconeixement internacional com el consell superior d'investigacions científiques (CSIC), vaig sol·licitar ser jo l'alumne seleccionat. Tot i així, des del CSIC s'oferien uns temes concrets, fet que em va fer dubtar una mica per no poder triar jo el tema del treball; però en posar-me en contacte amb els responsables de la meua estada al CSIC, vaig veure que la llibertat que em donaven a l'hora d'enfocar el treball era molt gran, i que l'oportunitat que m'oferien em serviria com a primer contacte directe amb el món de la investigació.

Després de meditar entre els possibles temes a tractar en el treball em vaig decantar pels tensioactius, una temàtica que fins aquell moment desconeixia, però ràpidament vaig començar a recopilar informació i vaig descobrir que interaccionem amb els tensioactius a diari, ja que es troben en molts dels productes que utilitzem habitualment, com el maquillatge, els detergents, els xampús... També vaig veure que des d'un punt de vista químic, són substàncies molt interessants per les seves propietats i estructura. Per tots aquests motius va ser que vaig decidir estudiar els tensioactius, i a més, la meua tutora del centre era la professora de Química, un avantatge a l'hora de fer el treball, ja que podria resoldre qualsevol dubte, tant teòric com pràctic.

En aquest treball vull estudiar els diversos tipus de tensioactius que existeixen, les seves propietats i estructura, i quins beneficis tenen tant en l'àmbit industrial com en el domèstic. A més, el que pretenc és donar a conèixer aquestes substàncies que la majoria d'estudiants mai arriben a conèixer.

Voldria realitzar també, una comparativa experimental de l'eficàcia entre dos dels tipus de tensioactius iònics que existeixen (els aniònics i els catiònics), agafant com a representatiu de cada grup uns dels tensioactius més utilitzats en la indústria, el Dodecil sulfat sòdic (SDS) com a tensioactiu aniònic i el Bromur d'hexadeciltrimetilamoni (CTAB) com a tensioactiu catiònic. Així com observar quina és la influència de la temperatura en el resultat final dels rentats, i si el tipus de teixit i brutícia també hi influeixen.

Caldrà tenir en compte que l'eficàcia dels tensioactius seleccionats no determinarà quin grup genèric (catiònics o aniònics) és el més eficaç, ja que aquesta propietat pot variar molt entre els tensioactius d'un mateix grup; però sí que poden marcar una tendència. Per a fer la comparativa s'utilitzaran diversos mètodes i eines, que seran bàsicament màquines de simulació de rentat i aparells de mesura de l'eficàcia (a través de la reflectància i la variació de color).

En l'àmbit personal i acadèmic, espero obtenir certa experiència i coneixements sobre els procediments, normes i mètodes que s'apliquen a l'hora de treballar en un laboratori professional d'investigació científica. A més, espero que realitzant el treball aprengui recursos i tècniques necessàries a l'hora de realitzar un treball d'aquestes dimensions i importància, les quals després em puguin ser d'utilitat per treballs futurs com ara el treball de final de carrera.

D'altra banda m'agradaria obtenir coneixements sobre els tensioactius i les seves utilitats en diversos àmbits.

Per a realitzar les hipòtesis, al no tenir cap indicatiu de quin tensioactiu pot ser més efectiu, vaig haver de realitzar un estudi preliminar explicat en el marc teòric del treball. Després d'aquesta recerca bibliogràfica, les meves hipòtesis són:

1. Els tensioactius aniònics són els més efectius, ja que les seves propietats els fan perfectes per als rentats tant domèstics com industrials.
2. Els tensioactius catiònics no són gaire efectius, perquè en estar carregats positivament, en lloc d'extreure la brutícia, són absorbits pels teixits que en general presenten càrrega negativa.
3. Com més alta sigui la temperatura, més elevada serà l'eficàcia, independentment del tipus de tensioactiu.

2. RECERCA I TRACTAMENT DE LA INFORMACIÓ

2.1. PRESENTACIÓ DE CONCEPTES

La neteja ha sigut sempre una necessitat bàsica de les societats, i actualment els detergents són l'opció més rentable i eficient. Antigament però, el sabó era l'única substància que cobria aquesta necessitat essencial.

En l'àmbit quotidià és habitual confondre els detergents i els sabons, els quals malgrat utilitzar-se amb el mateix propòsit, presenten diverses diferències.

La data d'aparició del sabó no està documentada, però se sap que, ja en el 3000 aC, aquest ja es fabricava en algunes regions. Amb el pas dels segles la seva producció va anar creixent i se l'hi van anar afegint diversos productes a la seva formulació, fins que a finals del segle XIX l'aparició dels detergents convencionals va relegar els sabons a una producció i ús quotidià.

Els sabons s'obtenen a partir de l'anomenada reacció de saponificació, que consisteix en la reacció entre un o diversos àcids grassos i una base. Es poden trobar en forma de pastilla, pols o crema i, generalment s'utilitzen en la higiene personal.

Els detergents, en canvi, no són una simple substància resultat d'una reacció química, sinó una barreja de diversos components, i a més, solen ser productes sintètics derivats del petroli. Els detergents s'utilitzen en tots els àmbits de neteja, tant l'industrial com el domèstic, i s'empren en el rentat de teixits i de superfícies.

No obstant això, els sabons i els detergents sí que tenen alguna cosa en comú. El principi actiu dels detergents (tensioactius), presenta una molècula amb una estructura quasi idèntica a la del sabó, la qual s'explica més endavant. Malgrat no ser habitual, a vegades es poden trobar sabons entre els components d'alguns detergents.



Figura 1: Sabons i detergents

2.2. DETERGENTS

2.2.1. Què són? Per a què s'usen?

El procés de detergència es coneix generalment com el procés a través del qual la brutícia es separa d'una superfície (generalment un teixit) a través d'una sèrie de fenòmens fisicoquímics. En aquest procés la brutícia és separada del teixit i es manté en suspensió en el dissolvent (aigua). Aquest procés es sol dur a terme amb l'ajuda d'un detergent, un producte dissenyat especialment per al procés de neteja, ja que realitza els anomenats fenòmens de detergència.

Dit d'una altra manera, els detergents són formulacions químiques que faciliten la separació de matèries externes o indesitjades d'una superfície sòlida a la qual s'hi troben adherida.

Els detergents estan formats per diversos components gràcies als quals poden dur a terme diverses accions a part de la de rentar, com la de blanquejar o suavitzar, entre d'altres. Els components es poden separar en dos grans grups¹:

- Essencials: els tensioactius (principi actiu).
- Complementaris: agents auxiliars, coadjuvants...

Per altra banda, l'aigua presenta certes propietats detergents, ja que per sí sola dissol gran part de la brutícia com ara el fang. Tot i així, hi ha matèries amb les quals l'aigua és immiscible, com per exemple els greixos. Els detergents en canvi, sí que poden dissoldre aquest tipus de substàncies gràcies a l'estructura molecular que presenta el tensioactiu del detergent. Per tant, per a que un detergent sigui suficientment eficaç, ha de ser barrejat amb aigua (que actua com a dissolvent). D'aquesta manera, es dissoldrà tant la brutícia soluble en aigua com la brutícia soluble en el detergent.

Els detergents s'utilitzen en diversos àmbits. Per exemple en la indústria tèxtil o química. A part, la majoria de fàbriques els utilitzen per al manteniment de la maquinària, com la indústria alimentària, que té uns requisits higiènics molt estrictes.

¹ Vegeu apartat 2.2.2. sobre els components d'un detergent.

L'àmbit domèstic és on es realitza un dels usos més significatius d'aquests productes, ja que són aptes per a netejar tant teixits com diversos tipus de superfícies.



Figura 2: Ús de detergents domèstics

A part, s'utilitzen també com a germicides o bactericides, ja que, per exemple, els tensioactius catiónics són perfectes per a regular el creixement de bacteris o gèrmens.

Podem dir que hi ha tres factors que influeixen directament en l'efectivitat d'un detergent:

- Acció mecànica: És la força mecànica que s'aplica durant el rentat (vibració, agitació, etc.), ja sigui a mà o a través d'un electrodomèstic. Per exemple, els rentats en una rentadora no serien tan efectius si aquesta no fes girar el tambor constantment. El moviment produeix el trencament de la capa superficial de brutícia.
- Acció tèrmica: És la temperatura que apliquem al rentat. Temperatures altes afavoreixen l'estovament de les taques i faciliten l'acció química.
- Acció química: És la més important de les tres. És l'acció que realitza el tensioactiu, que consisteix a reduir la tensió superficial en les interfases. ²

² Vegeu apartat 2.3.1. sobre els tensioactius i la tensió superficial

2.2.2. Components dels detergents

Els detergents comercials actuals són substàncies formades per una gran varietat de components, tots amb una finalitat concreta. Aquests són els principals components que podem trobar en les formulacions de detergents convencionals:

- **Tensioactiu**: Podem dir que aquest és el component més important dels detergents, ja que és el principal agent de neteja. És normal que en una formulació detergent no només hi trobem un únic tensioactiu, ja que se'n solen utilitzar diversos per a augmentar l'efectivitat. Són diverses les funcions que duen a terme: penetrar en el teixit profundament, aconseguir que l'aigua humitegi millor els teixits, separar la brutícia dels teixits i mantenir-la en suspensió a l'aigua per evitar que es dipositi de nou en aquest.
- **Agents coadjuvants**: Són les substàncies que milloren l'eficàcia i protegeixen el tensioactiu i l'ajuden a realitzar la seva tasca. Entre ells hi podem trobar diversos components que "estoven" l'aigua³. També en trobem alguns que mantenen la brutícia suspesa en l'aigua, evitant que es torni a dipositar sobre la superfície rentada. Els més comuns són: els polifosfats, els silicats solubles, els carbonats i els perborats.
- **Agents auxiliars**: Aquests components ajuden a la fluïdesa del detergent, és a dir, faciliten l'accés del detergent a totes les zones del teixit. A part d'això, són diverses les funcions que realitzen, com estabilitzar l'espuma, actuen com a colorants, etc... Alguns exemples són: el sulfat de sodi, que evita que la pols s'endureixi, o les substàncies fluorescents, que absorbeixen la llum ultraviolada i n'emeten una de blava, evitant així la tendència natural dels teixits a posar-se de color groc. D'altres com la carboximetilcel·lulosa, en ser absorbida pels teixits, evita que la pols s'hi adhereixi per repulsió elèctrica. En aquest últim cas, s'aprofiten les propietats físiques d'aquest agent auxiliar.
- **Enzims**: Malgrat trobar-se dins de la categoria d'agents auxiliars, són components essencials en els detergents, ja que la seva funció és trencar les molècules de les proteïnes i lípids de la brutícia, permetent així eliminar taques i restes de matèria orgànica, com la llet, sang, etc. La concentració d'enzims en un detergent acostuma a ser

³ Vegeu apartat 2.3.4. per a més informació sobre la duresa de l'aigua.

molt baixa, menys d'un 1%, ja que aquests no són consumits durant el rentat, només ajuden a activar diverses reaccions que faciliten el procés.

- Abrillantadors òptics: La seva única funció és donar lluminositat a la roba, ja que són substàncies fluorescents que en aclarir el teixit no se'n van, sinó que perduren en ell reflectint els raigs ultraviolats solars i donant un efecte de blancor en la roba. Aquest efecte de blancor és en realitat, només un efecte òptic, ja que el teixit no ha adquirit un to més blanc sinó que la llum en ser reflectida amb més intensitat provoca aquest efecte. També es poden aplicar en teixits de color, però en aquest cas, en lloc de blancor, l'abrillantador òptic els hi donarà un to més viu.
- Blanquejants: Al contrari que els abrillantadors òptics, aquests sí que netegen la roba, especialment les taques més difícils, deixant-la amb un to més blanc.
- Altres: A part dels exposats anteriorment, podem trobar diversos components més amb funcions menys rellevants, com els colorants i les fragàncies, que donen bona olor i neutralitzen les olors tant dels productes químics dels detergents com la de la brutícia extreta. També és normal trobar-hi suavitzants, que aporten suavitat al teixit, prevenen l'electricitat estàtica, redueixen les arrugues, etc. Tenim també estabilitzadors d'escuma, que se situen en la interfase aire-líquid i controlen la producció de l'escuma.

A continuació podem veure un exemple de les possibles proporcions que ocupen els components dins d'una formulació detergent, encara que se n'hi poden trobar molts més.

1. Tensioactiu $\approx 15\%$
2. Polifosfats + Silicats + Perborats (Agents coadjuvants) $\approx 50\%$
3. Sulfat de sodi + Substàncies fluorescents (Agents auxiliars) $\approx 19,5\%$
4. Enzims $\approx 0,5\%$
5. Aigua $\approx 15\%$

2.2.3. Tipus de detergents

Els detergents es poden classificar de dues maneres: Segons la seva acidesa o basicitat, és a dir el seu pH, o segons la forma amb la qual es comercialitzen. El pH és una escala en què es pot mesurar l'acidesa o basicitat d'una substància. Com podem veure a la imatge, el valor 7 indica que la substància és neutre. A mesura que el valor augmenta, la substància és més bàsica, i com més disminueix, la substància és més àcida.

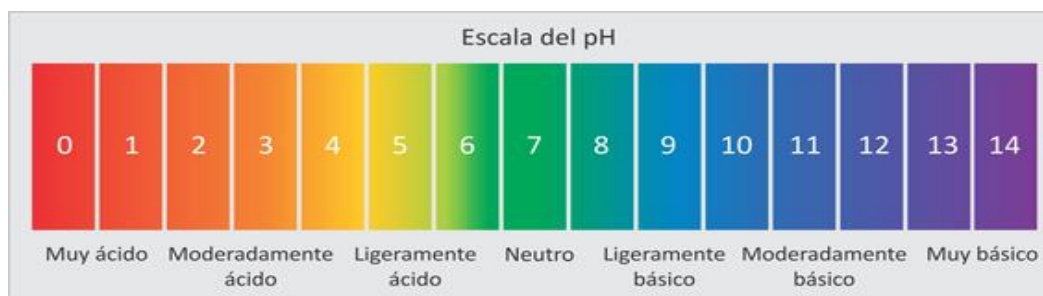


Figura 3: Escala de pH

Classificant els detergents segons el seu pH abans de barrejar-hi el tensioactiu, en podem trobar de tres tipus:

1. **Detergents alcalins o bàsics**: Són els que tenen un pH superior a 7, i per tant, són productes bàsics. Aquestes substàncies proporcionen una bona neteja de grasses incrustades, olis, proteïnes i altres matèries orgàniques. Generalment, a l'hora de rentar, es prefereixen els detergents alcalins, amb valors d'un pH entre 8 i 10,8, ja que tenen una eficàcia elevada contra brutícies àcides perquè les neutralitzen i les fan més fàcils d'eliminar.

La sosa càustica (NaOH) és la substància alcalina més forta que s'utilitza en detergència. Malgrat tenir múltiples desavantatges, com corroir metalls i ser extremadament nociu per a la pell humana, presenta diverses característiques que el fan apte per a situacions en les quals es requereix un detergent fort. Entre els més utilitzats també hi podem trobar el carbonat sòdic (Na_2CO_3) i el fosfat trisòdic (Na_3PO_4).

2. **Detergents àcids**: El seu pH es troba entre el 0 i el 6,5. La barreja de tensioactius amb formulacions àcides permet crear detergents que eliminen fàcilment substàncies inorgàniques. Són detergents que netegen amb rapidesa, i són aconsellables per a superfícies com el ciment o materials rocosos, ja que recuperen l'aparença estètica original de les façanes i superfícies en poc temps. Generalment s'utilitzen per a eliminar

materials incrustats en superfícies, com la corrosió que es forma en algunes i els òxids d'alguns metalls. Alguns dels més utilitzats són l'àcid clorhídric (HCl), l'àcid acètic (CH₃COOH) i l'àcid sulfònic (RC₆H₅SO₃H). També podem intercalar l'ús dels detergents àcids amb els alcalins, aconseguint així eliminar olors molestes i evitar que els microorganismes desenvolupin una certa resistència als detergents.

3. Detergents neutres: Són formulacions amb un pH que voreja el 7. Aquest tipus de detergents s'utilitzen bàsicament en l'eliminació d'olis lleugers, partícules petites, clorurs i altres tipus de sals. Són efectius en situacions en les quals no es requereix un detergent amb una solvència química elevada. Un dels problemes que presenten és la seva capacitat de corroure les peces que estan netejant, però aquest defecte es pot eliminar afegint inhibidors de corrosió al detergent.

L'altra manera de classificar els detergents és separant-los segons la forma en què es comercialitzen, és a dir, la seva presentació:

1. Detergent en pols: És el més comú, ja que des dels inicis de la rentadora és habitual utilitzar-lo, especialment en materials no molt sensibles o teixits blancs. S'utilitzen en aquest tipus de teixits perquè a temperatures altes, alguns actuen com a blanquejants i si s'utilitzessin en teixits sensibles o molt acolorits, els podria degradar o destenyir. Són els més utilitzats en l'àmbit domèstic i industrial.
2. Detergent líquid: En aquests últims anys ha adquirit més popularitat en el mercat. És el més recomanat per a teixits delicats i per als que s'hagin de rentar a baixes temperatures. Per a taques fortes no és recomanable, i tampoc per a decoloracions. Des d'un punt de vista ecològic no són molt recomanables, ja que el nombre de tensioactius que porten sol ser bastant elevat.
3. Detergent d'estat fix: És el que s'acostuma a presentar en forma de pastilla o càpsula. Presenta una millor efectivitat a temperatures altes, entre els 40 i 60 graus.



Figura 4: Detergents en pols, líquids i d'estat fix

2.2.4. Propietats dels detergents

L'efectivitat d'un detergent depèn directament de les seves propietats. Són quatre les característiques que un detergent ha de presentar obligatòriament per a dur a terme tot el procés de rentat⁴.

La humectació és la propietat que permet mullar un teixit. Com més humectant sigui el detergent, més mullarà la superfície que està tractant. Aleshores, una sola gota d'aigua podrà mullar una superfície més gran gràcies a la propietat humectant del detergent.

La penetració és la capacitat d'un detergent d'introduir-se dins una superfície, és a dir, un cop la gota d'aigua ja no pot abastar més superfície, aquesta comença a penetrar a través dels porus del teixit o superfície, i entra en contacte amb les zones on hi trobem la brutícia. En definitiva, és la capacitat d'enclavar-se o introduir-se en les superfícies brutes que siguin de caràcter porós o en la mateixa brutícia de la roba.

Una altra propietat molt important, és l'emulsionant o dispersant, que permet al detergent establir dispersions entre dos líquids que siguin immiscibles entre si. Dit d'una altra manera, és la suspensió de partícules petites d'un o més líquids, en un altre líquid, que siguin immiscibles entre ells, formant així una emulsió.

Com veiem a la imatge [Figura 5], tenim dos líquids immiscibles i finalment la fase B forma una emulsió i es dispersa en la fase A.

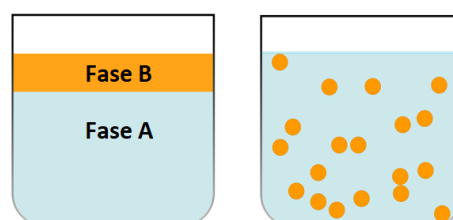


Figura 5: Líquids immiscibles i emulsió

⁴Les propietats estan explicades amb profunditat en l'apartat 2.3.3. Propietats dels tensioactius.

L'última propietat essencial és la de suspensió, que permet deixar la brutícia o partícules que ja han estat extretes, suspeses en la dissolució, evitant així que es tornin a dipositar en la superfície rentada.

2.2.5. Efectes dels detergents en el medi ambient

Avui en dia, els detergents són uns dels principals causants de la contaminació de medis aquàtics. Són diversos els països on les fàbriques aboquen, sense cap control, diferents tipus de residus dels processos de fabricació tèxtil a mars i rius, els quals contenen una gran concentració de tensioactius que resulten molt perjudicials per a tot l'ecosistema. Aquests són els principals problemes que causen els detergents:

- Formació d'espuma: L'abocament d'aquests productes provoca la formació de grans quantitats d'espuma a la superfície de l'aigua, que s'acumula a les costes provocant una alteració en els processos de sedimentació, i la disposició al fons marí de tensioactius, grasses i iodes, que resulten tòxics per al medi. Aquest fenomen és visible en diverses costes de ciutats amb una gran presència industrial.
- Eutrofització: Els detergents que són abocats a les aigües, presenten una gran concentració de fosfats, els quals són excel·lents nutrients per a la flora marina. Si aquests fosfats els combinem amb els nutrients que ja hi ha a l'aigua, es provoca una acceleració del creixement de les plantes aquàtiques, augmentant així la concentració d'oxigen en l'aigua. Com a conseqüència d'aquest augment d'oxigen dissolt en l'aigua, els éssers vius proliferen de manera excessiva, provocant que al cap d'un temps, el nombre de nutrients i la concentració d'oxigen en l'aigua es descompensi i disminueixi fins a uns nivells crítics. Com a resultat d'això, gran part dels éssers vius queden sense aliment suficient i moren. Aquests organismes morts, durant el seu procés de descomposició consumeixen les últimes reserves d'oxigen. A més, la descomposició allibera substàncies com el metà o l'amoníac que resulten tòxiques, donant lloc a allò que es coneix com a un ecosistema eutrofitzat. Un sistema eutrofitzat es considera un sistema no viable, ja que les conseqüències són catastròfiques, com el canvi en l'olor i el color de l'aigua o l'impediment de la circulació aquàtica; provocant que la vida en l'ecosistema es torni inviable.

- Malbaratament de fosfats: En els detergents, la concentració de fosfats sol ser molt alta, el que suposa un malbaratament d'un dels recursos més importants de la naturalesa, ja que aquest és un element necessari per exemple en el creixement de cultius agrícoles destinats al consum humà. Aquest ús descontrolat de detergents podria desembocar en una escassetat crítica d'aquest recurs en un futur.
- Efectes dels enzims actius: Alguns detergents contenen enzims, els quals ajuden a rentar restes orgàniques. El problema sorgeix quan aquests són usats en excés, ja que en abocar-los a les aigües, causen danys en els éssers vius (per actuació directa sobre ells, o de manera indirecta sobre els nutrients que necessiten per a sobreviure).
- Altres: Són moltes les conseqüències de l'abocament d'aquestes substàncies a les aigües, i aquestes no només afecten l'ecosistema, sinó que també afecten directament al funcionament de la indústria, com per exemple en els processos de tractament de les aigües residuals, ja que es pot arribar a corroir part de les plantes de tractament.

Aquest és un problema que el moviment ecologista i la comunitat científica no han passat per alt, i durant anys van pressionar a les autoritats corresponents per a instaurar uns controls de la concentració de substàncies tòxiques en aquests productes i processos. Des de fa un temps, els detergents han de passar una sèrie de controls en els quals han de presentar un cert grau de biodegradabilitat i uns nivells de toxicitat acceptables.

A més, des de fa un temps diversos científics treballen en la creació de tensioactius biocompatibles, que són tensioactius respectuosos amb el medi ambient, ja que estan fabricats a partir de substàncies naturals, com les proteïnes, polisacàrids, aminoàcids o olis naturals.



Figura 6: Ecosistema eutrofitzat



Figura 7: Acumulació d'escuma en platges

2.3. TENSIOACTIUS

2.3.1. Què són? Com actuen?

Els tensioactius són el principi actiu de gran part de les formulacions de detergents, ja que gràcies a la seva estructura molecular, permeten extreure la brutícia de manera ràpida i eficaç.

L'efectivitat dels detergents recau de manera quasi exclusiva en l'estructura molecular que presenten els tensioactius. Les molècules dels tensioactius són amfipàtiques, és a dir, que presenten dues parts: una que té afinitat per l'aigua (dissolvent) i és soluble en aquesta (extrem polar o hidròfil), i l'altra que repèl el dissolvent i és soluble en olis o altres substàncies no polars (extrem apolar o hidròfob).

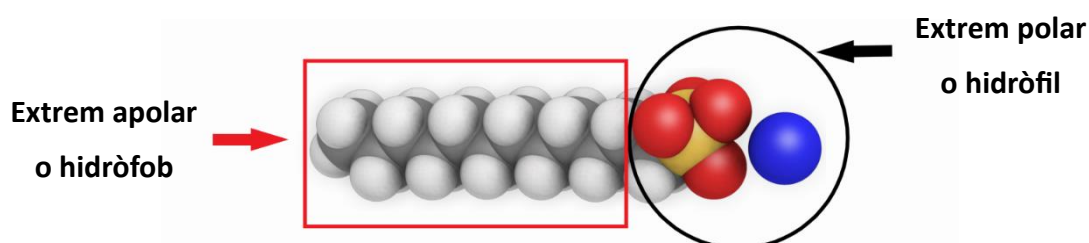


Figura 8: Molècula de tensioactiu

Gràcies a aquesta estructura, els tensioactius tendeixen a adsorbir-se en la zona de contacte entre dues substàncies de característiques diferents, anomenada interfase. Les molècules es col·loquen en les interfases i en modifiquen les seves propietats, concretament en modifiquen la tensió superficial, un fenomen que s'explica més endavant. Les molècules queden col·locades en la interfase amb l'extrem hidròfob en contacte amb la superfície que s'ha de rentar i l'extrem hidròfil en contacte amb l'aigua [Figura 9]. Aquest fenomen es produeix quan la concentració de tensioactiu és considerablement baixa.

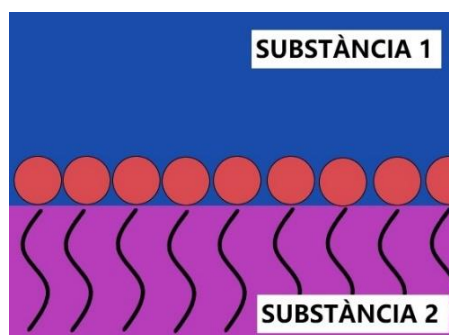


Figura 9: Molècules de tensioactiu a la interfase

A l'augmentar la concentració d'aquest, es manté l'adsorció en la interfase, fins que s'arriba a una certa concentració, anomenada concentració micel·lar crítica (CMC), a partir de la qual el tensioactiu deixa d'adsorbir-se en la interfase i forma autoagregats, que solen ser micel·les, encara que hi ha varies estructures més que es poden formar, com les micel·les cilíndriques o cristalls laminars.

Com veiem en el gràfic, quan s'arriba a la CMC, la tensió superficial de la interfase disminueix a nivells mínims, i en canvi, el poder de detergència augmenta.

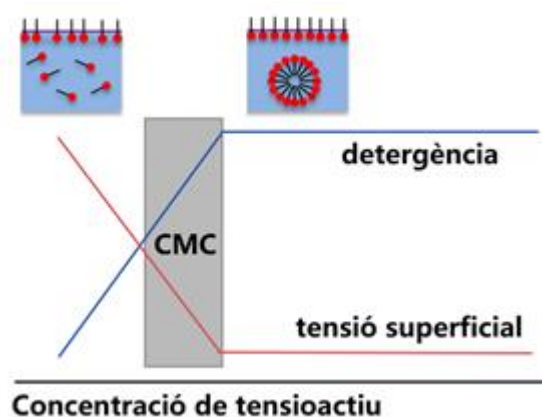


Figura 10: Detergència i Tensió superficial en funció de la concentració de tensioactiu

Les micel·les es formen perquè les molècules del tensioactiu disposen la seva part hidròfoba orientada cap a la brutícia i la part hidròfila estarà atreta per les molècules d'aigua, de manera que a poc a poc es va extraient la brutícia del teixit i aquesta, un cop extreta, queda envoltada completament pel tensioactiu. D'aquesta manera, la brutícia s'extreu del teixit i queda en suspensió en la dissolució. La capacitat de detergència dels detergents es deu, per tant, a aquesta propietat.

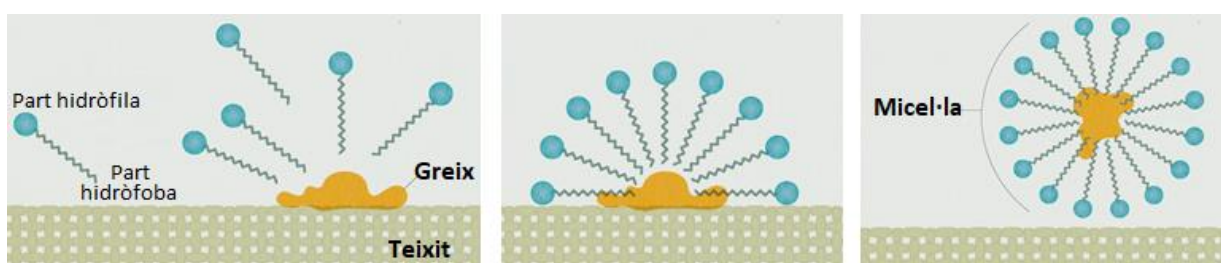


Figura 11: Procés de formació d'una micel·la

Com s'ha dit anteriorment, els tensioactius modifiquen la tensió superficial de les interfases, ja que així es permet una millor humectació del teixit.

Com s'explica en l'apartat 2.3.4. la tensió superficial és un fenomen que es produeix pel desequilibri de forces que presenten les molècules de les interfases. Aquesta tensió superficial impedeix que en dipositar una gota de la dissolució amb tensioactiu, aquesta presenti resistència a expandir-se per tot el teixit. Els tensioactius, en disminuir la tensió superficial, faciliten la feina del detergent i permeten una millor penetració en el teixit.

2.3.2. Tipus de tensioactius

Els tensioactius es poden classificar de diferents maneres, però la més usual i la utilitzada en la indústria, és la classificació en funció del seu grup hidròfil, ja que les característiques que aquest presenti, determinaran el comportament del tensioactiu.

És per això que depenent de l'aplicació que se li vulgui donar a un detergent s'utilitzarà un tensioactiu o un altre. Els tensioactius es classifiquen en: iònics (aniònics o catiònics), amfòters i no-iònics.

2.3.2.1. Tensioactius aniònics

Els tensioactius aniònics són els que en trobar-se en una dissolució aquosa es dissocien formant molècules que presenten una càrrega negativa en l'extrem hidròfil de la molècula. En general en aquest extrem hi trobem un grup carboxilat (COO^-), sulfat (SO_4^{2-}), sulfonat (SO_3^-) o fosfat (PO_4^{3-}). No obstant això, cal mencionar que per a mantenir la seva neutralitat elèctrica, la molècula s'associa amb cations, és a dir amb ions positius. A la part hidrofòbica i té llargues cadenes d'entre 12 i 14 carbonis.



Figura 12: Molècula de tensioactiu aniònic

Aquest tipus de tensioactius són els més utilitzats en els detergents comercials, especialment en els detergents en pols i líquids. L'ús d'aquests és tan gran que formen aproximadament un 55% de la producció de tensioactius a escala mundial. Podríem dir que els tensioactius aniònics, especialment els que tenen un grup sulfat o un sulfonat en la part hidròfila, són els que formen la majoria de formulacions detergents. El fet que siguin tan usats es deu a les seves propietats:

- Tenen una excel·lent capacitat netejadora tant en l'ús domèstic com en la indústria.
- Tenen un baix cost de fabricació i generalment una elevada efectivitat.
- Són respectuosos amb el medi ambient, ja que la majoria presenten una elevada biodegradabilitat i una toxicitat baixa en medis aquàtics.
- Tenen una gran capacitat emulgent, ja que afavoreixen que les emulsions es mantinguin estables durant més temps.

Principalment els aniònics s'utilitzen en sectors com la drogueria, la farmàcia i sobretot la detergència, ja que són capaços de dissoldre les substàncies que l'aigua no pot dissoldre per ella mateixa, com per exemple, els greixos o els olis. A més, la majoria de tensioactius aniònics tenen la capacitat de desnaturalitzar les proteïnes i trencar-les, un fet que augmenta el poder de neteja, però que a la vegada fa que freqüentment no siguin aptes per al contacte amb la pell, ja que alteren la barrera cutània i causen irritacions.

Se'n poden distingir quatre tipus:

- Sals d'àcids carboxílics ($\text{RCOO}^- \text{M}^+$): Sabons, polialcoxicarboxilats...
- Sals d'àcids sulfònics ($\text{RSO}_3^- \text{M}^+$): Alquilbencesulfonats (ABS), sulfonats del petroli...
- Èsters d'àcid sulfúric ($\text{R-O-SO}_3^- \text{M}^+$): Alquil sulfats, alquil èter sulfats, alquil fenol sulfatats, olis i grasses naturals sulfatades.
- Èsters de l'àcid fosfòric.

2.3.2.2. Tensioactius catiònics

Els tensioactius catiònics són els que tenen l'extrem hidròfil carregat positivament, al contrari que els aniònics, que el tenen negatiu. A l'extrem hidròfil hi solen presentar un grup amoni terciari o quaternari, i en l'hidrofòbic tenen cadenes lineals de diferents tipus de grups alquils (C12 – C18).



Figura 13: Molècula de tensioactiu catiònic

Els tensioactius catiónics presenten una sèrie de característiques que els fan aptes per a diversos usos:

1. En tenir l'extrem hidròfil positiu tenen la capacitat d'interaccionar amb les càrregues negatives de la superfície de fibres i cabells, fet que els fa aptes com a suavitzants tèxtils i condicionadors capil·lars.
2. Les amines i els compostos quaternaris que presenten, eliminen o limiten el creixement de microorganismes moleculars, com els bacteris o les algues, una propietat que fa que siguin usats com a components de desinfectants i detergents bactericides. Les molècules del tensioactiu s'orienten en la interfase entre la membrana dels bacteris i l'aigua de manera que formen una pel·lícula tancada que impedeix la respiració de l'organisme provocant-ne la mort.

Els tensioactius catiónics són de poca utilitat en neteja, ja que la majoria de superfícies sotmeses a processos de detergència tenen càrrega negativa, i els tensioactius catiónics (amb càrrega positiva), en lloc d'extreure i solubilitzar la brutícia adherida, se senten atrets pels teixits i són absorbits per aquests.

Per altra banda, en general són més costosos, ja que calen moltes reaccions per a sintetitzar-los.

Per tots aquests motius, no s'utilitzen gaire en processos de rentat, sinó que tenen usos més específics, com el de prevenció de la corrosió de metalls. En aquest cas, s'uneixen al metall per la part polar i formen una capa protectora hidròfoba que evita el pas de l'agent corrosiu.

Se'n poden distingir en general tres grups:

- Amines grasses i les seves sals
- Sals d'amoni quaternàries
- Imidazolines catióniques

2.3.2.3. Tensioactius amfòters

Els tensioactius amfòters són aquells que presenten tant una càrrega positiva com una negativa en l'extrem hidròfil, és a dir, que tenen un extrem dipolar, donant-los-hi així les propietats dels aniònics i dels catiònics. Depenent del pH que presenti la solució en la qual són dissolts, presentaran les característiques d'un tensioactiu o les d'un altre. Si el pH és bàsic, seran aniònics, i si el pH és àcid, seran catiònics. També hi ha la possibilitat que en el tensioactiu es manifestin les dues càrregues elèctriques simultàniament però que es trobin en equilibri. En aquest cas, el pH es troba en un punt anomenat isoelèctric.

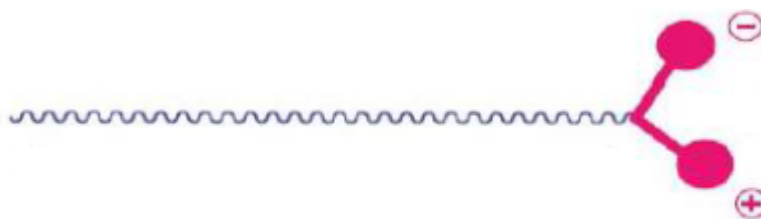


Figura 14: Molècula de tensioactiu amfòter

Normalment en la part polar presenten un grup carboxilat (COO^-) o un grup sulfat (SO_4^{2-}), com a càrrega negativa i un grup amoni quaternari (R_4N^+) en la càrrega positiva.

Tanmateix, els amfòters, són uns tensioactius amb unes propietats úniques:

- La propietat de poder ser utilitzats en formulacions detergents que ja tenen un tensioactiu catiònic o aniònic sense entrar en conflicte amb ells, és a dir, la biocompatibilitat amb aquest tipus de tensioactiu.
- El baix risc de causar irritacions en la pell i els ulls.
- La duresa que presenta l'aigua en què són utilitzats acostuma a no tenir repercussions en la seva eficàcia.

El sector on més s'usen és en cosmètica, concretament en productes d'ús cutani i xampús, ja que alguns d'aquests tensioactius produeixen grans quantitats d'espuma. El fet que el seu cost de producció sigui tan elevat fa que siguin uns dels menys comercialitzats a escala mundial.

2.3.2.4. Tensioactius no-iònics

En aquests tensioactius la part hidròfila de la molècula no té càrrega, sinó que és un extrem no carregat elèctricament. Com a conseqüència, en una dissolució aquosa no es dissociarà en ions, i no es veuran afectats pel pH de la solució.



Figura 15: Molècula de tensioactiu catiónic

Una dels seus desavantatges és la seva baixa capacitat escumant, en contraposició als amfòters que sí que presenten aquesta característica. No obstant això, sí que tenen una elevada capacitat humectant i els seus efectes sobre la barrera cutània són molt lleus.

En general se'ls pot separar en dos grups, els alcohols i els èsters. Alguns exemples dels diferents grups de tensioactius no-iònics són:

- Alcohols etoxilats
- Èsters grassos de glucosa
- Òxids d'amina

Bàsicament, s'utilitzen en tractaments de neteja suaus, i també per a estabilitzar emulsions reduint-ne la tensió superficial. Són compatibles amb els tensioactius aniònics i catiónics, ja que els ions de calci i magnesi que presenta l'aigua dura no els afecten.

2.3.3. Propietats dels tensioactius

Les propietats d'un detergent depenen directament de les propietats que presenta el tensioactiu, ja que en ser-ne el principi actiu, és el que aporta la majoria de les propietats al detergent. És per això que la majoria de propietats d'un tensioactiu (la propietat humectant, emulsionant i de penetració) són les mateixes que les d'un detergent. Els tensioactius presenten cinc propietats essencials:

- **Propietat humectant:** Com s'ha explicat anteriorment, una interfase és la superfície de contacte entre dues fases de propietats diferents. Com sabem, els tensioactius modifiquen la tensió superficial de les interfases, i quan aquesta és entre un líquid i un

sòlid, la disminució de la tensió superficial permet que el líquid s'expandeixi al llarg de la superfície i l'humecti. En resum, els tensioactius disminueixen la tensió superficial entre el líquid i la superfície que es vol rentar, permetent que aquest cobreixi més superfície. Com s'observa en la imatge següent, en la interfase 2, veiem com la gota presenta una gran tensió superficial i, els tensioactius la modifiquen per a aconseguir que finalment la tensió superficial sigui quasi nul·la i la dissolució s'expandeixi el màxim possible (interfase 4).

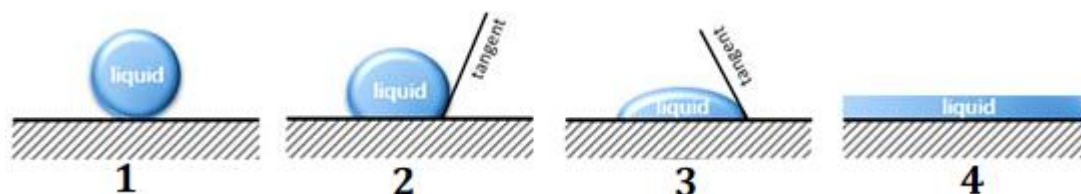


Figura 16: Modificació de la tensió superficial

- **Propietat penetrant:** Normalment el dissolvent en el qual s'utilitza el tensioactiu és polar, i el sòlid o teixit que es vol rentar és apolar. Aleshores les molècules del tensioactiu es disposen de manera que tenen la part hidròfoba orientada cap al teixit i la part hidròfila cap a l'aigua. D'aquesta manera la tensió superficial de la interfase sòlid-líquid (teixit-dissolució) disminueix, permetent així que l'aigua entri en el teixit. Aquesta propietat s'utilitza en els processos de rentat i de tenyit, en els quals es necessita una bona penetració en els teixits.
- **Propietat emulgent o dispersant:** Una de les principals característiques dels tensioactius és que estableixen les dispersions entre dos líquids immiscibles entre si, ja que permet que es barregin formant emulsions. Una emulsió és la barreja estable i heterogènia de dos líquids que tendeixen a separar-se. Els tensioactius permeten que el detergent mantingui en suspensió gotes microscòpiques de greix.
- **Propietat escumant:** És la propietat que permet als tensioactius formar escuma, un fet que els ajuda a arrossegar impureses i partícules de grasses. L'escuma es genera quan l'aire penetra en l'interior del líquid, ja que les molècules es disposen de manera que formen una cambra d'aire, envoltada per una capa de molècules de tensioactiu amb la part hidròfoba dirigida cap a l'aire i la part hidròfila cap a l'aigua [Figura 17].

Aquesta és una propietat que no tots els tensioactius presenten, i que no és del tot essencial, però en detergència domèstica, el consumidor sol buscar detergents que generin espuma per la falsa creença que així neteja millor.

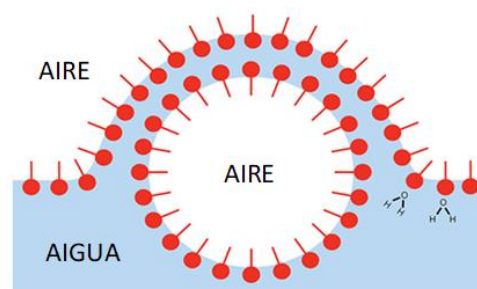


Figura 17: Estructura de l'escuma

- **Propietat detergent:** És la capacitat d'un tensioactiu d'eliminar la brutícia separant-la de la superfície del teixit i emulsionant-la en l'aigua. És la propietat més important d'un detergent, ja que si un detergent no la presenta, és un detergent ineficaç. No obstant, per a presentar aquesta característica, ha de tenir les propietats esmentades anteriorment. Aquesta propietat es deu en gran part a la forma de la molècula d'un tensioactiu.⁵

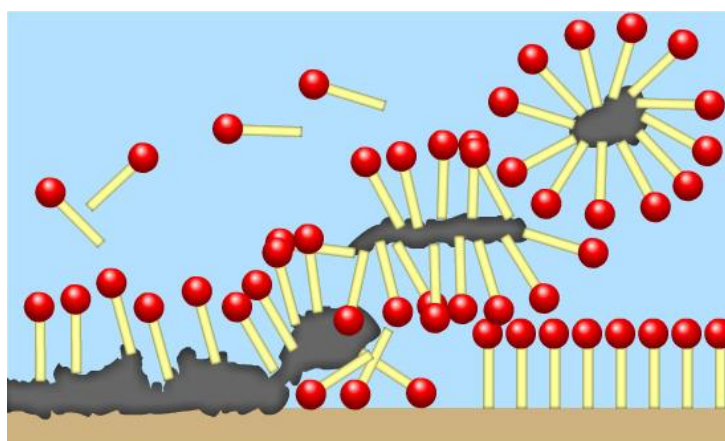


Figura 18: Propietat detergent

⁵ Vegeu apartat 2.3.1. sobre les molècules d'un tensioactiu i com actuen durant el rentat.

2.3.4. Propietats de l'aigua relacionades amb els tensioactius

Perquè un tensioactiu (detergent en general) sigui eficaç, s'ha de barrejar amb un dissolvent (aigua), les propietats del qual poden interferir en l'eficàcia del tensioactiu. L'aigua presenta una sèrie de propietats que a vegades poden fer que un tensioactiu no pugui ser utilitzat en ella.

La duresa de l'aigua és la qualitat que presenten les aigües amb altes concentracions d'ions de metalls pesants, principalment d'ions calci i magnesi. La majoria de tensioactius presenten una elevada resistència a les aigües dures, un dels principals motius pels quals van acabar substituint als sabons, els quals tendeixen a precipitar en aquest tipus d'aigües. La duresa de l'aigua es sol expressar en la quantitat de carbonat de calci (CaCO_3), equivalent a la quantitat de calci (Ca) encara que aquesta sal no es troba pròpiament en l'aigua. Es suma la concentració de ions Ca i Mg (mil·ligrams) existents en cada litre. Es considera que una aigua és dura quan té més de $120 \text{ mgCaCO}_3 / \text{l}$.

La tensió superficial també és una característica de l'aigua que està relacionada amb els tensioactius, ja que com s'ha explicat, aquests la modifiquen per a facilitar el procés de detergència. Tècnicament, la tensió superficial és la quantitat de treball necessari per a expandir la superfície de la interfase⁶. Dit d'una altra manera, la tensió superficial és deguda a l'asimetria de les interaccions intermoleculars que es produeixen en la interfase, tal com veiem a l'esquema [Figura 19].

A la imatge veiem una molècula d'aigua que es troba a l'interior del líquid i les seves forces es troben en perfecte equilibri, ja que a l'interior del líquid les molècules experimenten forces d'atracció cap a altres molècules en totes les direccions, la suma de les quals és zero. En canvi en l'altra imatge veiem una molècula a la superfície del líquid (interfase) a la qual li falten algunes molècules veïnes, causant un desequilibri de les forces, ja que les forces que s'atrauen cap a molècules veïnes resulten en una força major que empeny les molècules cap a baix, provocant que sigui més difícil expandir la superfície del líquid.

És per aquest motiu que els líquids, quan es troben sobre una superfície sòlida, tendeixen a formar gotes i no a expandir-se completament per la superfície.

⁶ Vegeu apartat 2.3.1. sobre els tensioactius i les interfases

Com ja sabem, les interfases són zones de contacte entre dues “fases” de propietats diferents (per exemple, en la figura 19, la zona de contacte entre l'aire i l'aigua seria una interfase). Els tensioactius es situen en aquestes i en modifiquen la tensió superficial, permeten així una millor capacitat d'humectació, tal com s'explica en l'apartat 2.3.3.

Els tensioactius poden actuar en diferents tipus d'interfases: líquid-líquid (emulsió), sòlid-líquid (dispersió) i gas-líquid (escuma).

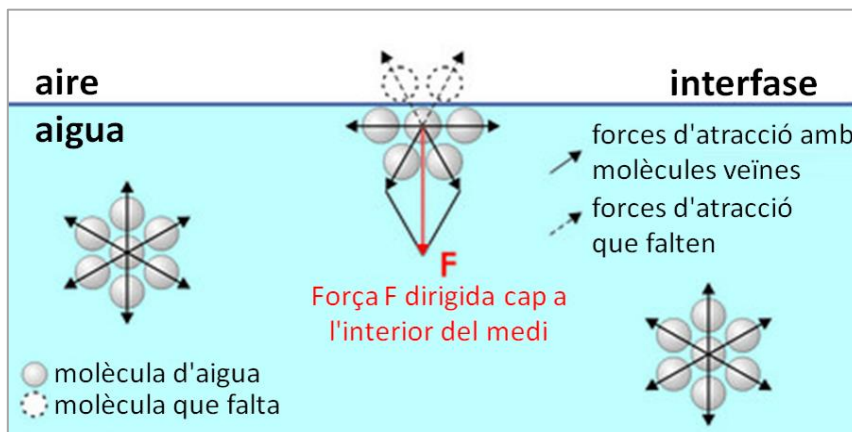


Figura 19: Tensió superficial

3. PART EXPERIMENTAL

3.1. DISSENY EXPERIMENTAL

Els experiments realitzats tenen com a objectiu saber quin tipus de tensioactiu és més efectiu, si els catiònics o els aniònics, en unes condicions reproduïbles i controlades. També volem veure si la temperatura, el tipus de teixit i el tipus de brutícia rentada influeixen en l'efectivitat del tensioactiu.

Per a realitzar la part pràctica, vam triar un tensioactiu representatiu de cada grup, tenint en compte el seu ús en la indústria. Els dos tensioactius seleccionats són:

- **CTAB:** El bromur d'hexadeciltrimetilamoni ($C_{19}H_{42}BrN$), és un tensioactiu catiònic que s'utilitza en diversos camps a part de la detergència, com la Genètica o la Nanociència. És una sal d'amoni quaternària, la qual presenta un grup alquil de gran longitud. Cal manipular-lo amb precaució, ja que en contacte amb la pell pot provocar irritació.

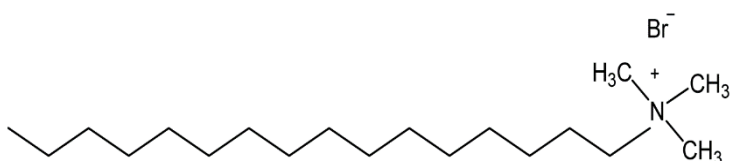


Figura 20: Recipient de CTAB

- **SDS:** El dodecil sulfat sòdic ($NaC_{12}H_{25}SO_4$), és un tensioactiu aniònic utilitzat en diversos productes d'higiene personal. Està format per una cadena de 12 carbonis i un extrem amb un sulfat. També presenta un cert grau d'irritabilitat.

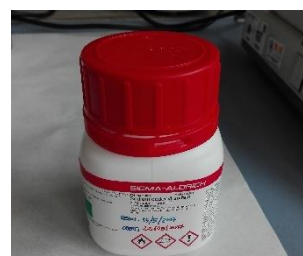
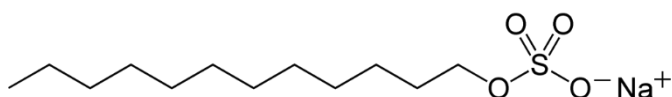


Figura 21: Recipient de SDS

Per veure la influència de la temperatura, la brutícia i el tipus de teixit en l'eficàcia del tensioactiu, es van realitzar diversos rentats variant alguns paràmetres. Aquestes són les variacions:

- **Teixits:** Es van utilitzar dos tipus de teixits, el cotó i el polièster/cotó (65/35), ja que són els dos materials més utilitzats en la fabricació de peces de roba. A banda, es van diferenciar també teixits blanquejats sense abrillantadors, i teixits de color per observar la variació d'eficàcia.
- **Tipologia de brutícia:** Els dos teixits seleccionats estaven tacats amb diferents brutícies. Els tipus de brutícies que vam utilitzar van ser: la combinació pigment/sèu (greix animal), pels teixits blanquejants, la combinació grassa/quars/òxid de ferro pel cotó, i midó amb un tint enllaçat químicament pel polièster/cotó.
- **Tensioactius:** Es van utilitzar els dos tensioactius esmentats anteriorment, el SDS i el CTAB.
- **Temperatura:** Com s'ha mencionat, volíem veure la influència de la temperatura en els rentats, per això els vam realitzar a dues temperatures, a 30 °C i 60 °C.

Això no obstant, alguns paràmetres els vam mantenir iguals en tots els rentats: La duresa de l'aigua (166 ppm en CaCl₂), la velocitat de rotació dels agitadors mecànics (400 rpm), el temps de rentat (30 minuts) i la mida de la tela (7,5 x 7,5 cm).

Si teníem en compte totes les variants, el nombre de rentats que havíem de fer eren 24, i tenint en compte que necessitàvem fer 3 rèpliques de cada experiment per obtenir uns resultats més fiables, van ser 72 els rentats realitzats.

En general, podem dividir el model d'experiment en quatre fases:

1. Preparació del rentat
2. Procés de rentat
3. Procés d'esbandit i assecat
4. Extracció dels resultats

1- PREPARACIÓ DEL RENTAT

Com que només volíem comparar l'efectivitat dels tensioactius, no vàrem utilitzar detergents comercials per a l'estudi, ja que aquests detergents, a part del tensioactiu contenen diverses substàncies que poden influir en el resultat de l'estudi.

Per tant, per a fer el rentat vam preparar una dissolució amb una concentració del 0,1% del tensioactiu, així podríem obtenir uns resultats que reflectissin només l'eficàcia d'aquest.

La duresa de l'aigua en la qual és fa el rentat també influeix en el resultat final, i aquesta propietat varia molt depenent de la zona, per exemple, a Barcelona, l'aigua presenta diferents dureses en els diferents districtes. Per això vam decidir preparar nosaltres mateixos una mostra d'aigua, que tindria una duresa considerada com a estàndard, a partir d'aigua pura milli-Q i Clorur de calci (CaCl_2).

- **Aigua milli-Q:** L'aigua milli-Q és aigua purificada i desionitzada que ha passat per un sistema de filtres i purificació exhaustiu. Aquesta aigua no presenta duresa, per tant, la vam usar per a fer la nostra pròpia aigua afegint-li nosaltres CaCl_2 .
- **Clorur de calci:** Vam utilitzar el clorur de calci (CaCl_2) perquè és soluble en aigua, és a dir, en una dissolució aquosa els seus ions es dissocien, de manera que l'aigua tindrà ions calci (Ca^{2+}), els quals augmentaran la duresa de l'aigua.

L'aigua que vam preparar tenia un contingut de clorur de calci de 166ppm (mg/l), una duresa considerada com a estàndard.



Figura 22: Equip d'aigua milli-Q

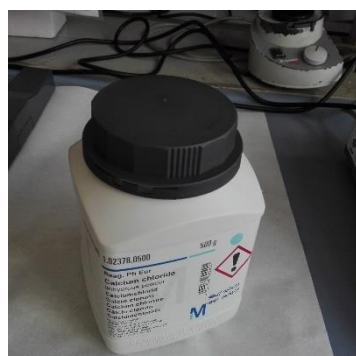


Figura 23: Recipient del CaCl_2

Un cop vam tenir l'aigua preparada, aquesta va ser la que vam utilitzar per a fer la dissolució amb el tensioactiu d'una concentració del 0,1%, de manera que per a cada kg de dissolució tindríem 1 g de tensioactiu. Un cop realitzada la dissolució, hi vam posar un nucli magnètic o imant i vam col·locar el recipient en un agitador magnètic, per a fer una mescla homogènia. De manera que obteníem una agitació automàtica i constant.



Figura 24: Procés d'agitació magnètica

Com que volíem estudiar dos tensioactius, van ser dues les dissolucions que vam fer, una amb el CTAB i l'altra amb l'SDS.

Per altra banda vam retallar les teles que volíem utilitzar per als rentats en quadrats de 7,5 x 7,5 cm.



Figura 26: Teixit 120 abans de ser retallat



Figura 25: Teles retallades de 7,5 x 7,5 cm

A la següent taula s'exposen les teles utilitzades, les quals són proporcionades per l'empresa *Swissatest*, que proporciona teles amb brutícia estàndard per a estudis científics. Els números que apareixen a la taula seran els utilitzats per a referir-se a cada teixit.

| Referència | Teixits | Tipus |
|------------|---|-------------|
| 221 | Cotó, blanquejat cretona, sense abrillantador òptic | Sense tacar |
| 213 | Polièster/cotó 65/35, blanquejat, sense abrillantador òptic | Sense tacar |
| 118 | Cotó tacat amb sèu/pigment | Tacat |
| 120 | Cotó tacat amb greix/quars/òxid de ferro | Tacat |
| 119 | Polièster/cotó 65/35, tacat amb sèu/pigment | Tacat |
| 162 | Polièster/cotó 65/35, tacat amb midó | Tacat |

2- PROCÉS DE RENTAT

Per a fer els rentats vam utilitzar agitadors mecànics, els quals amb les seves pales simulen el procés de rentat que realitza una rentadora. Vàrem situar els recipients metàl·lics a sobre d'una placa calefactora, la qual amb l'ajuda d'una sonda, controlava la temperatura del rentat, i van posar en marxa les pales. Un cop la sonda marcava la temperatura correcta, vam aturar les pales i amb unes pinces vam introduir la tela en el recipient. A la vegada que es posaven en marxa els agitadors, començàvem a comptar el temps amb un cronòmetre.

Només disposàvem de tres agitadors, així que els rentats es realitzaven de tres en tres. Calia vigilar que durant el rentat les teles no deixessin anar fils, ja que podien enganxar-se amb les pales, provocant que la tela quedés encallada i s'hagués de repetir el rentat.



Figura 27: Agitadors mecànics



Figura 29: Sonda



Figura 28: Placa calefactors

3- PROCÉS D'ESBANDIT I ASSECAT

Un cop finalitzat el rentat, vam extreure la tela del recipient i la vam introduir en un altre amb aigua de l'aixeta, on hi estava quatre minuts. Aquest procés es va repetir dues vegades més, ja que així ens asseguràvem que no quedessin restes de tensioactiu en el teixit.

Amb un adhesiu on hi constava el tensioactiu, número de teixit i la temperatura, vam etiquetar la tela i la vam deixar assecat a temperatura ambient. Un cop assecada, la vam portar a una sala aclimatada on sempre hi fa la mateixa temperatura i humitat, on hi havia de passar 24 hores.

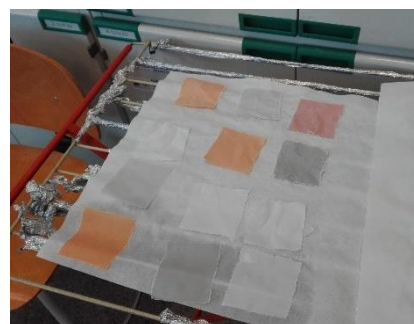


Figura 30: Assecament de les teles

4- EXTRACCIÓ DELS RESULTATS

Un cop les teles van haver passat 24 hores en la sala aclimatada, a través del procés d'espectrofotometria vàrem analitzar la reflectància en el cas dels teixits blancs o grisos i la variació de color en els teixits de color. Per a realitzar aquestes mesures es va utilitzar un espectrofotòmetre, el qual mesura les característiques mencionades dels teixits i n'extreu els resultats.

3.2. MÈTODES I TÈCNIQUES DE LABORATORI

3.2.1. Procés de rentat

Per a simular el procés de neteja que realitza una rentadora convencional, en un inici volíem fer servir el mètode utilitzat en la majoria de laboratoris a l'hora de realitzar un estudi d'aquestes característiques. La màquina utilitzada normalment en aquests processos disposa de sis pales, el que ens permet fer sis rentats a la vegada en uns recipients metàl·lics, i està pensada per a rentats de teles petites. La màquina, controla també el temps i temperatura del procés.

A causa d'una avaria en l'aparell, vam haver de buscar un nou mètode que ens permetés fer el mateix procés. Finalment, vam utilitzar uns agitadors mecànics individuals, que també funcionaven amb pales i ens permetien també controlar la temperatura amb una sonda. No obstant això, el temps el vam haver de controlar nosaltres amb un cronòmetre. La resta del procés està explicat en l'apartat de disseny experimental (vegeu apartat 3.1.).

És un procés que s'utilitza en general a l'hora de comparar l'eficàcia de diferents tensioactius o analitzar com influeixen certs factors en aquesta.

3.2.2. Espectrofotometria

La funció principal d'un espectrofotòmetre [Figura 31] és interpretar els colors de la mateixa manera que ho fa l'ull humà. La visió dels homes és tricromàtica, ja que tenim tres cèl·lules anomenades cons i, cada un és sensible a un determinat color: el blau, vermell o verd. La percepció de la resta de colors es fa a través de l'estimulació de més d'un con a la vegada. Com sabem, els objectes reben la llum, i depenent de les seves propietats, són capaços d'absorbir-ne una part i de reflectir-ne la resta, la qual és captada pels nostres ulls.

L'espectrofotometria és la tècnica que s'utilitza per a mesurar el color; és a dir, obtenir valors numèrics de la quantitat de llum reflectida per l'objecte. L'espectrofotòmetre il·lumina la tela i calcula la quantitat de llum que aquesta reflecteix i la que absorbeix. Un teixit totalment blanc reflectirà tota la llum, i un teixit negre l'absorbirà tota. Per tant, mesurarem la reflectància de les teles abans de ser rentades i després del rentat, veient així sí que s'ha produït una variació del color després del rentat.



Figura 31: Espectrofotòmetre

3.3. RESULTATS I DISCUSSIÓ

Un cop vam haver fet tots els rentats i les teles van estar 24 hores en la sala aclimatada, vam mesurar la reflectància de cada un dels teixits. Malgrat que simplement amb la vista es pot apreciar alguna variació, amb l'espectrofotòmetre es pot apreciar de manera més clara.

Cal mencionar que l'espectrofotòmetre mesura valors diferents depenent del tipus de teixit. Per als teixits que són de color blanc o gris (221, 213, 118 i 199) mesurarem la reflectància de cada teixit, dit d'una altra manera, mesurarem el grau de blanc. En canvi, per als teixits de color (120 i 162) mesurarem la variació de color, ja que en els teixits de color no podem apreciar del tot la reflectància. Malgrat que estiguem mesurant paràmetres diferents, estem analitzant la mateixa capacitat del detergent, la del poder de detergència, ja que volem veure si el tensioactiu ha pogut eliminar els residus i tornar el teixit al seu estat original. Els teixits 221 i 213 són els teixits originals, i el que volem és eliminar totalment la brutícia de la resta de teixits (incloent-hi els pigments), veient així si el tensioactiu té una forta capacitat detergent.

TEIXITS BLANCS O GRISOS

Per als teixits blancs o grisos analitzarem primer els cotons (221/118) i prendrem quatre mesures: reflectància del teixit sense tacar i sense rentar ($R_a = 221$), reflectància després de ser tacat però sense ser rentat ($R_b = 118$), reflectància del teixit no tacat després de ser rentat ($R_c = 221$ rentat) i la reflectància del teixit tacat després de ser rentat ($R_d = 118$ rentat). Aquests quatre valors (R_a , R_b , R_c i R_d) s'expressen en les taules següents en una escala sobre 100. Després a partir d'aquestes mesures, utilitzarem l'equació de Kubelka - Munk, la qual relaciona aquests quatre paràmetres i ens dona l'eficiència detergent del tensioactiu.

$$\text{Equació Kubelka - Munk} = 1 - \left[\left[\frac{(1 - R_d)^2}{2R_d} \right] - \left[\frac{(1 - R_c)^2}{2R_c} \right] \right] / \left[\left[\frac{(1 - R_b)^2}{2R_b} \right] - \left[\frac{(1 - R_a)^2}{2R_a} \right] \right]$$

- On:
- R_a Reflectància abans del tacat i rentat
 - R_b Reflectància després del tacat
 - R_c Reflectància després del rentat sense tacar
 - R_d Reflectància després del tacat i rentat

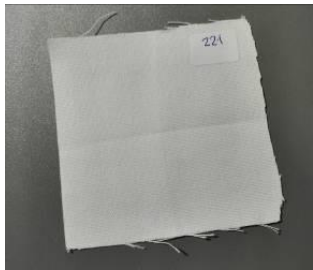

El resultat de l'equació serà un valor entre 0 i 1, sent zero la mínima reflectància possible i 1 la màxima. Com s'ha explicat anteriorment, hem fet tres rèpliques de cada un, per tant tindrem tres valors de cada paràmetre.

Aleshores, realitzarem l'equació tres vegades i després en farem la mitjana amb els 3 resultats obtinguts. Per a calcular l'error, la fórmula recomana realitzar una derivada, però vam optar per a realitzar la desviació estàndard, que és més senzilla.

El procés que seguirem per als polièster/cotó serà exactament el mateix, però amb els teixits 213 i 119. En la taula següent s'expressen els valors de la reflectància dels teixits blancs o grisos abans de ser rentats. Aleshores ja tindriem dos dels valors necessaris per a l'equació de Kubelka – Munk.

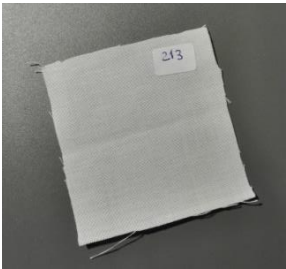
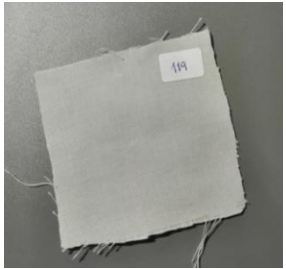
| Referència | Teixits | Reflectància abans del rentat = Ra |
|------------|---|------------------------------------|
| 221 | Cotó, blanquejat cretona, sense abrillantador òptic | 73.858 |
| 213 | Polièster/cotó 65/35, blanquejat, sense abrillantador òptic | 49.307 |
| 118 | Cotó tacat amb sèu/pigment | 42.950 |
| 119 | Polièster/cotó 65/35, tacat amb sèu/pigment | 44.400 |

En la taula següent s'exposen els resultats dels teixits 221 i 118 després de ser rentats. Estan separats primer per tensioactiu, i dins de cada tensioactiu hi ha les dues temperatures. L'apartat en el qual ens hem de fixar és el de l'eficiència de detergència, ja que la resta són dades utilitzades en l'equació.

| Tensioactiu | Temp. | Rc i Rd | | | | | | Eficiència detergent (Eq. Kubelka-Munk) |
|-------------|-------|---|--------|--------|--|--------|--------|--|
| | | Reflectància després del rentat (Cotó) | | | Reflectància després del rentat (Cotó) | | | |
| | | Sense tacar [221] | | | Tacat [118] | | | |
| | |  | | |  | | | |
| SDS | 30°C | 74.305 | 74.180 | 73.670 | 48.408 | 49.215 | 47.153 | 0.30 ± 0.01 |
| | 60°C | 72.455 | 74.013 | 74.185 | 50.458 | 51.300 | 48.978 | 0.40 ± 0.03 |
| CTAB | 30°C | 72.225 | 71.660 | 73.063 | 48.723 | 49.035 | 46.885 | 0.32 ± 0.06 |
| | 60°C | 71.100 | 71.632 | 71.368 | 49.695 | 49.028 | 49.353 | 0.39 ± 0.02 |

Una de les coses que s'observen a primera vista és que els rentats a 60 °C presenten una eficiència de detergència més alta respecte als de 30 °C. També podem veure que en les dues temperatures, els dos presenten una eficàcia quasi idèntica: 30 °C (0,30 / 0,32) i 60 °C (0,40 / 0,39).

En aquesta taula en canvi, estan exposats els resultats dels teixits de polièster/cotó 65/35 després de ser rentats. (213 / 119)

| Tensioactiu | Temp. | Rc i Rd | | | | | | Eficiència detergent (Eq. Kubelka-Munk) |
|-------------|-------|--|--------|--------|---|--------|--------|--|
| | | Reflectància després del rentat (Polièster/cotó) | | | | | | |
| | | Sense tacar [213] | | | Tacat [119] | | | |
| | |  | | |  | | | |
| SDS | 30°C | 49.517 | 48.438 | 49.913 | 45.830 | 44.353 | 44.793 | 0.21 ± 0.10 |
| | 60°C | 47.603 | 48.230 | 49.170 | 48.900 | 48.573 | 48.380 | 1.05 ± 0.11 |
| CTAB | 30°C | 48.403 | 48.415 | 48.620 | 44.925 | 46.683 | 44.938 | 0.40 ± 0.23 |
| | 60°C | 47.730 | 48.158 | 48.688 | 47.893 | 47.653 | 47.865 | 0.93 ± 0.10 |

Primer cal puntualitzar algunes dades. En el rentat de l'SDS a 30°C es va haver d'eliminar una de les rèpliques, ja que el resultat era molt diferent a la resta i, si el teníem en compte, ens donava una eficiència de 0,14. Segurament això és degut a un error experimental. També, com es pot apreciar en el rentat de l'SDS a 60°C tenim una eficiència superior a 1, fet que és impossible. Això pot ser degut al fet que a l'hora de mesurar el teixit, hi hagués alguna arruga i la lectura de la reflectància no fos del tot correcte.

En els polièsters també s'observa que com més elevada és la temperatura més alta és l'eficàcia, independentment del tensioactiu. Aquí també veiem com no n'hi ha un que destaquï sobre la resta. A 30°C és clarament més efectiu el CTAB, però a 60°C l'SDS és més efectiu, encara que cal tenir en compte que com s'ha dit els resultats podrien presentar certs errors.

Podem veure com en alguns rentats, dels teixits 213 i 221 la reflectància després del rentat és més baixa, cosa que ens pot estranyar, però això pot ser perquè en posar un teixit blanc a rentar-se se li poden adherir les sals de l'aigua dura o restes de tensioactiu a la superfície, fent que perdi certa reflectància.



Figura 33: Exemple procés de rentat



Figura 32: Exemple procés de rentat

TEIXITS DE COLOR

A continuació s'exposen els resultats dels teixits de color. En aquest tipus de teixit s'utilitza una altra equació, anomenada equació CIE.

En aquesta equació veiem com es calculen les anomenades coordenades de color, que són valors com la lluminositat i la intensitat d'alguns colors. Es mesuren aquests valors a la tela abans i després de ser rentada i es comparen, obtenint així la variació de color.

$$\Delta E = [(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2]^{1/2} \quad (\text{Canvi de color})$$

$$\text{On: } L^* = 116 \left(\frac{y}{y_n}\right)^{\frac{1}{3}} - 16 \quad (\text{Lluminositat})$$

$$A^* = 500 \left(\frac{x}{x_n}\right)^{\frac{1}{3}} - \left(\frac{y}{y_n}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Vermell - verd})$$

$$B^* = 200 \left(\frac{y}{y_n}\right)^{\frac{1}{3}} - \left(\frac{z}{z_n}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Blau - groc})$$

x_n, y_n, z_n són els tres valors triestímul d'un estàndard

x, y, z són els valors triestímul de la mostra

Cal mencionar que en aquesta equació no hi ha un valor màxim en els resultats. Se'ns dona un valor numèric de la variació de color i posteriorment s'ha de comparar amb la resta de valors i trobar la variació més alta.

Per a calcular la variació de color s'aplica l'equació als resultats de les tres rèpliques i després es fa la mitjana entre els tres resultats.

En aquest tipus de teixit, al contrari que els grisos o blancs, no tenim en compte el teixit no tacat (221 i 213), sinó que només mesurem el color del teixit tacat abans de ser rentat i després del rentat, veient així quina és la diferència en el color.

| Referència | Teixits | Imatge |
|------------|--|--|
| 120 | Cotó tacat amb greix/quars/òxid de ferro |  |
| 162 | Polièster/cotó 65/35, tacat amb midó |  |

En ambdós teixits tenim un pigment, el qual dona el color al teixit. En el 120 l'òxid de ferro actua com a pigment, i en el 162, com que el midó no es pot apreciar a simple vista, hi té un pigment enllaçat químicament. En els dos casos el que volem és eliminar tant brutícia com pigment.

En la següent taula s'expressa la variació de color que s'ha produït en el teixit 120, que és un cotó.

| Tensioactiu | Temperatura | ΔE Canvi de color | Desviació estàndard |
|-------------|-------------|------------------------------|---------------------|
| SDS | 30°C | 2.00 | 0.52 |
| | 60°C | 3.42* | 0.75 |
| CTAB | 30°C | 10.23 | 1.43 |
| | 60°C | 13.37 | 0.72 |

* En aquest càlcul es va haver d'eliminar un dels tres resultats a l'hora de fer la mitjana perquè aquest es diferenciava molt de la resta.

Com en tots els casos, els rentats a 60°C són més efectius. En aquest cas veiem que el CTAB presenta una eficàcia més elevada en les dues temperatures. Com es pot apreciar, la variació de color és molt elevada, i això també ho podem veure a simple vista, ja que veiem que el teixit ha perdut gran part del seu color vermell.

En la taula posterior estan els resultats del teixit 162, un polièster.

| Tensioactiu | Temperatura | ΔE Canvi de color | Desviació estàndard |
|-------------|-------------|------------------------------|---------------------|
| SDS | 30°C | 1.51 | 0.36 |
| | 60°C | 3.08 | 0.77 |
| CTAB | 30°C | 1.07 | 0.16 |
| | 60°C | 1.41 | 0.17 |

Aquí podem observar que l'SDS és més efectiu en les dues temperatures, però tampoc amb una diferència significativa.

CONCLUSIONS GENERALS

A partir de les taules anteriors, són diverses les conclusions que podem extreure:

1. En tots els rentats si la temperatura era de 60°C, l'eficàcia era clarament més elevada que en els rentats de 30°C, un fet que s'ha complert en el 100% dels casos estudiats.
2. Si analitzem l'eficàcia del CTAB, veurem que els rentats on ha presentat una eficàcia més elevada han sigut els rentats realitzats en els teixits de cotó (221/118/120). I dins d'aquests, en els rentats dels teixits 221 i 118 veiem com en el rentat a 30°C presenta una eficàcia lleugerament més alta, però a 60°C presenten una eficàcia quasi idèntica.

En el teixit 120, hi ha una diferència de quasi 10 punts entre l'SDS i el CTAB en el rentat a 30°C. També ha presentat una eficàcia més elevada en els rentats dels 213 i 119 a 60°C, encara que pot ser que els resultats no siguin exactes, ja que vam haver d'eliminar un dels valors.

3. En canvi, en els rentats realitzats en els polièster/cotó, l'SDS ha presentat una eficàcia més alta. Cal mencionar que en els rentats dels teixits 213 i 119 a 30°C, el CTAB presenta una eficiència de detergència més elevada que l'SDS. En el 162, tanmateix, és clarament més eficaç.

L'objectiu dels experiments era realitzar una comparativa pràctica entre dos tensioactius, un d'aniònic (SDS) i un de catiònic (CTAB), per a veure quin tipus de tensioactiu és més eficaç. Donar una resposta a la pregunta que ens plantejàvem no és fàcil, ja que com hem vist, els resultats canvien depenent del tipus de teixit o la brutícia utilitzada en el rentat. Segons els resultats obtinguts la resposta que podem donar és:

- L'eficàcia d'un tensioactiu depèn del teixit en el qual sigui utilitzat i el tipus de taca que es vol tractar. Però en general, podem dir que els tensioactius catiònics funcionen millor en cotons, en canvi, si el que volem és tractar polièster/cotó el millor és utilitzar un tensioactiu aniònic. Cal tenir en compte que dels dos grups de tensioactius que volíem estudiar, vam realitzar l'experiment només amb un tipus de cada grup, basant-nos en el seu ús en la indústria, i per tant aquest enunciat és molt general, i poden haver-hi tensioactius dins d'un dels grups estudiats que actuïn de manera diferent a les que s'estableixen en l'enunciat.

Així doncs, podem concloure que no podem extreure un resultat general que ens indiqui quin tipus de tensioactiu és més eficaç, sinó que depèn de diferents factors, com el tipus de teixit i segurament també el tipus de brutícia.

Potser seria convenient repetir alguna part de l'experiment o potser l'experiment complet, ja que hi ha alguns rentats que caldria concretar millor el resultat, com els rentats dels teixits 213 i 119, ja que es van cometre diversos errors durant els rentats i la mesura de la reflectància. També en el teixit 120 es va haver d'eliminar algun dels resultats perquè no concordaven amb la resta. Per tant, seria millor repetir alguns dels experiments vigilant de manera més estricta tant els rentats com la mesura dels resultats. També seria encertat, realitzar més repliques per a aconseguir uns resultats més acurats, o afegir altres variants, com augmentar les rpm o fer rentats amb més tipus de brutícia.

4. CONCLUSIONS

En començar el treball em vaig plantejar unes hipòtesis que m'han servit per portar a terme tant la part teòrica com la part pràctica; un cop acabada la recerca i realitzada la part experimental, passaré a valorar les hipòtesis inicials.

Hipòtesi 1: Els tensioactius aniònics són els més efectius, ja que les seves propietats els fan perfectes per als rentats tant domèstics com industrials.

Aquesta hipòtesi no la puc ni confirmar ni refutar, ja que gràcies a la part experimental he pogut comprovar que l'eficàcia d'un tensioactiu depèn de diversos factors, com el tipus de teixit o la brutícia tractada. No obstant això, sí que he pogut observar certes tendències, com que els tensioactius aniònics funcionen bé en teixits de polièster/cotó, especialment en teixits de color, encara que presenten certa eficàcia també en teixits grisos i blancs.

Hipòtesi 2: Els tensioactius catiònics no són gaire efectius, perquè en estar carregats positivament, en lloc d'extreure la brutícia, són absorbits pels teixits que en general presenten càrrega negativa.

Gràcies a la recerca realitzada en la part teòrica he pogut saber que els tensioactius catiònics per la seva naturalesa catiònica són usats a l'hora de formular suavitzants, enlloc d'utilitzar-se en detergència. Gràcies a la part experimental puc refutar aquesta hipòtesi, ja que han sigut diversos els casos en els quals el tensioactiu catiònic ha presentat una eficàcia de detergència més elevada que els aniònics. Com passa amb la hipòtesi anterior, tampoc puc confirmar-la al 100%, ja que he descobert que l'eficàcia d'un tensioactiu depèn de diversos factors. No obstant, sí que es pot observar que aquest tipus de tensioactiu presenta millor eficàcia detergent en els teixits de cotó.

Hipòtesi 3: Com més alta sigui la temperatura, més elevada serà l'eficàcia, independentment del tipus de tensioactiu.

Aquesta hipòtesi la puc confirmar totalment, ja que aquest fet s'ha complert en tots els casos. Això és degut a l'acció tèrmica, ja que una temperatura elevada permet l'estovament de les taques i en facilita el rentat.

Per tal de poder confirmar o refutar amb seguretat les hipòtesis 1 i 2, seria interessant ampliar l'estudi experimental, per exemple, utilitzant altres tipus de teixits i brutícia, com també afegir altres variables o realitzar més rèpliques.

Respecte als objectius personals, puc afirmar que els he complert; he pogut treballar en l'ambient d'un laboratori professional i he tingut l'oportunitat d'utilitzar tècniques i mètodes pròpies d'experiments científics. També he pogut aprendre moltes coses sobre els processos de detergència i els tensioactius i la resta de components d'un detergent.

En general puc dir que ha estat un treball molt satisfactori a nivell personal, que m'ha permès ampliar els meus coneixements sobre el tema i aclarir les preguntes que em vaig plantejar en un principi.

BIBLIOGRAFIA

- García Domínguez, Juan José. *Tensioactivos y detergencia* / 2a ed, Madrid: Dossat, 2009. ISBN: 9788496437869.
- Centellas Masuet, Francesc A ; i altres. *Recull d'experiments de química per a estudiants de batxillerat: fem química al laboratori* / Barcelona: Publicacions i edicions de la universitat de Barcelona (UB), 2011. ISBN: 9788447534791
- Yanxin, Yu; Jin, Zhao; Bayly, Andrew E. / *Development of Surfactants and Builders in Detergent Formulations*.
Revista: Chinese Journal of Chemical Engineering, 2008 / Volum 16(4), pp. 497-662.

WEBGRAFIA

- Revista Botanical-Online / *Botanical online: El món de les plantes*.
<<http://www.botanical-online.com/monografias/efectosdetergentes.htm>>
[Consulta: Setembre, 2017]
- Moreno, Xenia; Rodríguez, Maika; Reina, Oriol. / *DeterClean*.
<<http://oriolreinacaballer.wixsite.com/projectedeterclean/blank-azs62>>
[Consulta: Setembre, 2017]
- Varela, Antonio / *Ciencianet*.
<<http://ciencianet.com/detergente.html>> [Consulta: Juliol, 2017]
- IOC (Institut Obert de Catalunya) / *Minops: Què fan els detergents?*
<<http://miniops.ioc.cat/11/data/5.html>> [Consulta: Setembre, 2017]
- Solé Cabanes, Antonia / *Tensioactivos*
<<https://es.slideshare.net/asolengin/tensioactivos>> [Consulta: Setembre, 2017]
- *Quivacolor: Tipos de detergentes*
<<https://quivacolor.com/tipos-de-detergentes/>> [Consulta: Agost, 2017]
- SITA: Process Solutions / *SITA: Process parameter surface tension*
<<https://www.sita-process.com/information-service/process-parameter-surface-tension/overview/>> [Consulta: Setembre, 2017]

IMATGES: Les fotos del laboratori són pròpies i els esquemes són proporcionats per l'IQAC.